

Металлические кластеры. Содержат от нескольких единиц до нескольких десятков тысяч атомов. В металлических кластерах из нескольких атомов может реализоваться как ковалентный, так и металлический тип связи. Металлические кластеры - важный пример конечной Ферми-системы и по своим свойствам во многом аналогичны атомным ядрам. Металлические кластеры используют в технике в качестве катализаторов благодаря их высокой реакционной способности. С металлическими кластерами, имплантированными в матрицу, связывают будущий прогресс в нанотехнологии.

Алгоритм выполнения работы:

Берем “магические” кластеры, состоящие из атомов бора (из 7 и 19 атомов).

Обычно нас интересует внутреннее состояние системы частиц (можно исследовать, например, фазовые переходы). Из принципа относительности следует, что равномерное поступательное движение системы как целого не влияет на ее внутренние свойства. Поэтому, естественно, исключить такое движение, т. е. задать суммарный импульс системы равным нулю. При исследовании изолированных кластеров необходимо исключить вращение системы как целого, занулив полный момент импульса.

Нас интересует кинетическая энергия и ее зависимость от температуры.

Мы находим кинетическая энергию через формулу температуры для плоского кластера:

$$T = \frac{2 * \text{sum}(E_k)}{(2 * N - 3) * k},$$
$$\text{sum}(E_k) = \frac{T * (2 * N - 3) * k}{2},$$

где N – число частиц в кластере, k – постоянная Больцмана.

Число частиц в кластере в наших двух случаях равны 7 и 19. Постоянная Больцмана $k = 1,380649 * 10^{-23}$ Дж/К.

Начальные условия: $t_0 = 1000\text{K}$.

И будем медленно нагревать наши кластеры бора до 2348K (температура плавления бора). Вначале температура будет повышаться. В некоторый момент, однако, температура перестает расти, несмотря на приток тепла, при этом происходит фазовый переход — плавление. Далее проследим как меняется кинетическая энергия наших кластеров в зависимости от температуры.

Для этого составим массив из наших данных кинетической энергии и температуры.

Составим график зависимости кинетической энергии бора от температуры. Где мы можем сравнивать различие бором с 7 и 19 атомами.

Результатом нашего проекта будет график зависимости температуры от кинетической энергии. Где мы сможем определить изменение для разных кластеров с разным количеством атомов и проследить за устойчивостью их энергии.